

ساختار نواری و چگالی حالت‌های AIN در فاز ورتسایت به روش FP-LAPW

محمدزاده، سعیده؛ رضایی، بهروز؛ کلانی، منوچهر

پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز

چکیده

این مقاله اطلاعات کاملی را در مورد ساختار باند و چگالی حالت‌های کلی و جزئی AIN در فاز ورتسایت با استفاده از روش خودسازگار پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) تحت تقریب چگالی موضعی (LDA) ارائه می‌کند. نوار ممنوع محاسبه شده برای AIN در فاز ورتسایت بصورت مستقیم است و توافق خوبی را در مقایسه با سایر روشها و مقدار تجربی نشان می‌دهد.

مقدمه

تهیه دیودهای نورافشان (LED) با نور آبی و سبز و نیز ساخت دیودهای لیزری (LD) در گستره طیف آبی و یا فرابنفش، مستلزم مطالعه دقیق نیمه هادیهای گروه سوم نیتريدی است [۱-۲]. ترکیبات گروه سوم نیتريدی مانند AIN، GaN و InN به خاطر داشتن نوار ممنوع بزرگ، خصوصیات جالبی از جمله رسانایی حرارتی قابل ملاحظه و استحکام زیاد، از خود نشان می‌دهند و همین ویژگیها سبب می‌شود که در ساخت دستگاههای فشار و دمای بالا مورد استفاده قرار گیرند [۳]. ساختار بلوری گروه سوم نیتريدی به دو صورت بلند-روی^۱ و ورتسایت^۲ است و در سالهای اخیر مطالعه خواص ساختاری و الکترونی این مواد به دلیل کاربردهای فراوانی که در صنعت دارند، مورد توجه ویژه قرار گرفته است. در کار حاضر خواص الکترونی بلور AIN با ساختار ورتسایت بررسی شده است.

روش محاسبه

محاسبات ما بر اساس تئوری تابع چگالی^۳ (DFT) استوار است و از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل^۴ (FP-LAPW) استفاده کرده ایم [۴]. در این روش فضای داخل بلور به دو ناحیه داخل کره های اتمی معروف به کره های مافین تین و ناحیه بینابین کره ها تقسیم می‌شود. پتانسیل بدون تقریب تقارن کروی به صورت پتانسیل کامل در نظر گرفته می‌شود بطوریکه پتانسیل و چگالی بار هر دو بسطی به شکل زیر دارند [۴]:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(\vec{r}) Y_{lm}(\vec{r}) & r \in \text{Muffin-tin region} \\ \sum_k V(k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} & r \in \text{Interstitial region} \end{cases} \quad (1)$$

سهم پتانسیل تعویضی-همبستگی^۵ نیز با یک روش تقریبی به نام تقریب چگالی موضعی^۱ (LDA) قابل محاسبه است. است. با داشتن $n(r)$ و حل معادله پواسون، $V(r)$ به دست می‌آید و ماتریس هامیلتونی تشکیل می‌شود، لذا یک

1- Zink-blend

2- Wurtzite

3- Density functional theory

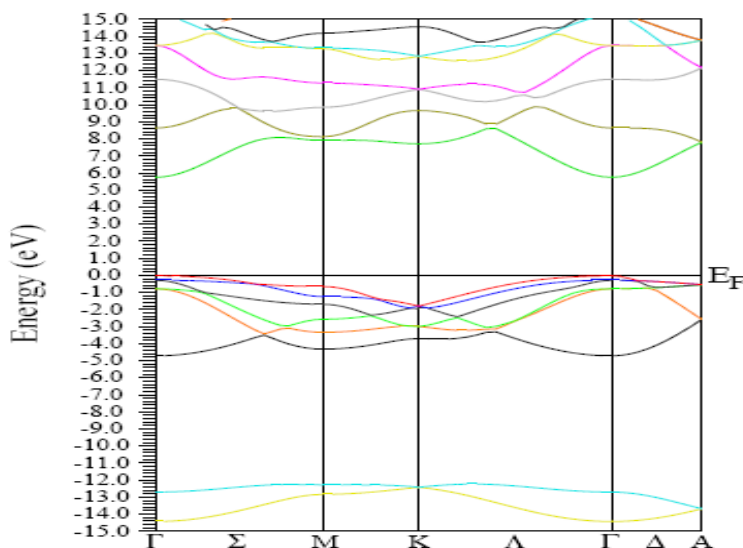
4- Full potential - linearized augmented plane wave

5- Exchange-correlation

فرایند خودسازگاری برای دستیابی به جواب لازم است که برای انجام محاسبات از برنامه رایانه ای Wien 2k استفاده شده است [۵]. اتمهای Al و N در ساختار ورتسایت به ترتیب در موقعیتهای (0,0,0)، (1/3,2/3,1/2) و (0,0,u)، قرار دارند. پارامتر بدون بعد u را که بیانگر فاصله بین اتمهای Al و N در زیر شبکه در امتداد محور c است، برابر ۰/۳۸۵ گرفته ایم. برای پارامترهای شبکه از مقادیر تجربی $a=3/11$ و $c=4/98$ آنگستروم استفاده شده است. درون کره ها، چگالی بار و پتانسیل بر حسب هارمونیکهای کروی تا $l=10$ بسط داده شده اند، شرط محدود کننده تابع پایه در ناحیه بینابین را برابر $R_{mt}K_{max}=7$ انتخاب شده که در آن K_{max} بردار موج قطع و R_{mt} کوچکترین شعاع کره مافین تین است. شعاع کره های مافین تین برای Al و N را به ترتیب برابر ۱/۸۵ و ۱/۶۵ بوهر انتخاب کرده ایم. فرایند تکرار تا جاییکه اختلاف انرژی دو حالت نهایی به ۰/۱ ریهدرگ همگرا شود، انجام می گیرد.

نتایج و بحث

ساختار نوار الکترونی حالت پایه AlN در فاز ورتسایت بدون در نظر گرفتن اندرکنش اسپین-مدار در امتداد جهات تقارن اصلی ناحیه بریلوئن در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: ساختار نواری AlN در فاز ورتسایت با استفاده از روش FP-LAPW تحت تقریب LDA بدون اندرکنش اسپین-مدار

پهنای نوار ظرفیت ۱۴/۵ eV است. نوار ظرفیت پایین مابین ۱۴/۵ eV و ۱۲/۷ eV واقع شده است. نوار ممنوع مستقیم و بزرگ در AlN فاز ورتسایت به خاطر وجود اندرکنش بین اربیتالهای 3s اتم Al و 2s اتم N است و دارای مقدار ۵/۷ eV است که در مقایسه با گزارشات قبلی [۶-۱۱] و مقدار تجربی [۱۲] توافق بیشتری دارد. در مجاورت قله نوار ظرفیت ترازهای انرژی که در AlN فاز بلند-روی بصورت سه گانه تبهگن هستند، در حالت ورتسایت شکافته

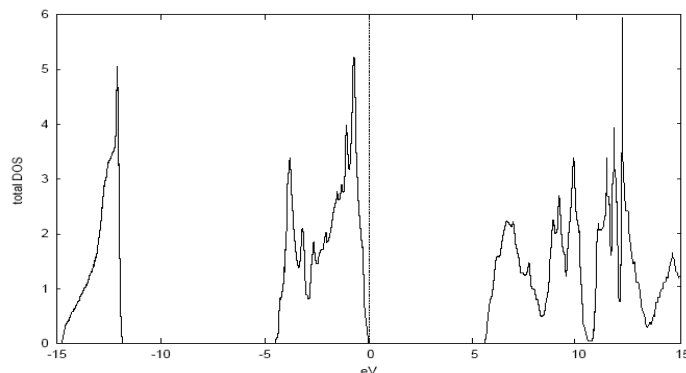
¹- Local density approximation

می شوند. این شکافتگی مابین ترازها که ناشی از تقارن هگزاگونال^۱ ساختار ورتسایت است، جداشدگی میدان - بلوری^۲ نامیده می شود و مقدار آن را 230 meV بدست آورده ایم. در جدول ۱ انرژی ممنوع محاسبه شده در این روش همراه با نتایج بدست آمده از روشهای گوناگون از قبیل شبه پتانسیل با پایه های امواج تخت^۳ و پایه های توابع گوسی^۴ تحت تقریبهای LDA [۶-۱۱] و GGA^5 [۶]، و همچنین مقدار تجربی [۱۲] مقایسه شده است.

جدول ۱: مقایسه نوار انرژی ممنوع محاسبه شده و مقایسه آن با سایر محاسبات نظری و مقدار تجربی

روش	FPLAPW	PPPW	PPPW	PPPW	PPPW	PPPW	PPPW	PPGB	تجربی
تقریب	LDA	LDA	GGA	LDA	LDA	LDA	LDA	LDA	---
انرژی گاف (ev)	۵/۷	۴/۷۴	۴/۲۴۵	۴/۴۱	۴/۴۴	۳/۰۹	۴/۵۶	۴/۲	۶/۲۸
	[کار حاضر]	[۶]	[۶]	[۷]	[۸]	[۹]	[۱۰]	[۱۱]	[۱۲]

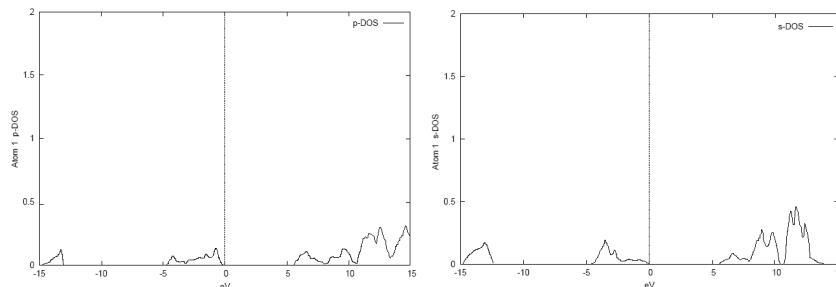
چگالی حالت های کلی و جزئی^۶ AIN فاز ورتسایت در شکل های ۲-الف تا ۲-ه نشان داده شده است.



شکل ۲-الف: چگالی حالت های کل AIN فاز ورتسایت

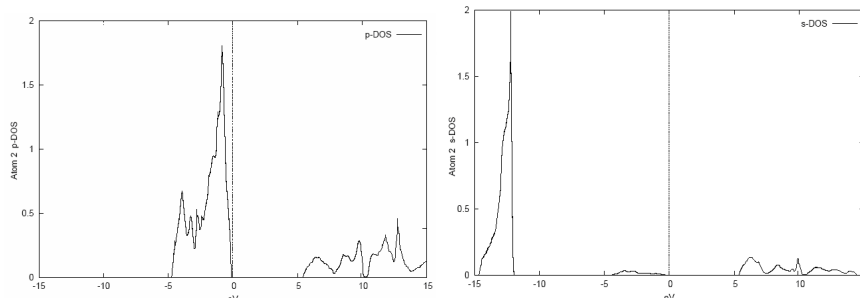
ملاحظه می شود که چگالی حالت های کل به سه ناحیه نوار ظرفیت پایین، نوار ظرفیت بالا و نوار رسانش تقسیم شده است. سهم عمده نوار ظرفیت پایین مربوط به حالت $2s$ اتم N است (شکل ۲-ه) و بخش بالایی نوار ظرفیت بیشتر حالت های $2p$ اتم N (شکل ۲-د) و $3s$ و $3p$ اتم Al را شامل می شود (شکل ۲-ب و ج). در مجاورت قله نوار ظرفیت اربیتال های $2p$ اتم N بیشترین سهم را دارد. اربیتال $3s$ اتم Al هم در نوار ظرفیت پایین و هم در نوار رسانش سهم بسزایی دارد.

- 1- Hexagonal
- 2- Crystal Field splitting
- 3- Pseudo potential plane wave
- 4- Pseudo potential Gaussian basis
- 5- General gradient approximation
- 6- Total and Partial Density of States



شکل ۲-ب: چگالی اربیتال p اتم Al

شکل ۲-ج: چگالی اربیتال s اتم Al



شکل ۲-د: چگالی اربیتال p اتم N

شکل ۲-ه: چگالی اربیتال s اتم N

نتیجه گیری

در کار حاضر ساختار الکترونی و چگالی حالت‌های کلی و جزئی AlN در فاز ورتسایت با استفاده از روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) محاسبه شده است. با استفاده از تقریب چگالی موضعی (LDA) برای محاسبه پتانسیل تعویضی - همبستگی و افزایش تعداد نقاط k در منطقه بریلوئن، نتیجه بهتری برای نوار ممنوع به دست آمده است که در مقایسه با گزارشات قبلی [۶-۱۱] و مقدار تجربی [۱۲] توافق خوبی دارد. علاوه بر آن چگالی حالت‌های کلی و جزئی محاسبه شده، جزئیات بیشتری را در مورد ساختار نواری نشان می‌دهند که می‌تواند برای مطالعات کاربردی مفید واقع شود.

مراجع

1. S. Nakamura, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, R 27 (1999).
2. S. Nakamura and G. Fasol, *The Blue Laser Diode* (1997).
3. L. E. Ramos, L. K. Teles and et al. *Phys. Rev. B* **63**, 165210 (2001).
4. P. Blaha and K. Schwarz, WIEN2K, Vienna University of Technology, Austria (2002).
5. P. Blaha, K. Schwarz and et al. *Computer Physics Communications* **59**, 399 (1990).
6. C. Stampfl and C. G. Van de Walle, *Phys. Rev. B* **59**, 5521 (1999).
7. A. F. Wright and J. S. Nelson, *Phys. Rev. B* **51**, 7866 (1995).
8. M. B. Nardelli, K. Rapcewicz and et al. *Materials Research Society* **449**, 893 (1997).
9. P. E. V. Camp, V. E. V. Doren and J. T. Devreese, *Solid State Commun.* **81**, 23 (1992).
10. A. Satta, V. Fiorentini and et al., *Materials Research Society* **395**, 515 (1996).
11. D. Vogel, P. Krueger and J. Pollmann, *Phys. Rev. B* **55**, 12836 (1997).
12. B. Paulus, F. H. Shi and H. Stoll, *J. Phys. Condens. Matter* **9**, 2745 (1997).